

Verena Schallhart / Thomas Steiner / Lukas Möltner

Numerische Simulation des thermischen Verhaltens verschiedener Katalysatormaterialien für Pkw

121 - LEP - Low Emission Powertrains

Abstract

Die in Abgasnachbehandlungsanlagen implementierten Katalysatoren können erst nach Erreichen einer bestimmten Mindesttemperatur, der light-off Temperatur, Schadstoffemissionen effizient umsetzen und somit dazu beitragen, die Abgasnormen zu erfüllen. Die light-off Temperatur wird je nach Fahrprofil erst nach einigen Minuten Fahrzeit erreicht und kann bei bestimmten Fahrzyklen selbst nach längerer Zeit wieder unter die erforderliche Mindesttemperatur sinken. Ziel dieser Forschungsaktivität ist die Optimierung des Anspringverhaltens von Katalysatoren und das Beibehalten der light-off Temperatur während des Betriebs mittels numerischer Simulation. Das dafür erstellte Simulationsmodell beschreibt den konvektiven Wärmetransport vom heißen Abgas an den Katalysator, die Konduktion im Katalysator selbst und die Wärmeverluste an die Umgebung. Die Simulation wird anhand experimenteller Messungen am Motorprüfstand validiert. Mithilfe dieses Modells ist es möglich, Auswirkungen der stark instationären Betriebsbedingungen eines Verbrennungsmotors auf den Thermohaushalt des Katalysators über die geometrische Länge abzubilden und zu bewerten.

Keywords:

Katalyse, Abgasnachbehandlung, light-off Temperatur, Dieselmotor

1. Einleitung

Der Dieselmotor bietet in Kombination mit modernen Auflade- und Einspritzsystemen und einem konstant hohen Drehmoment über einen breiten Drehzahlbereich ausgezeichnete Fahrleistungen bei vergleichsweise moderatem Verbrauch. Aufgrund dieser Eigenschaften hat der Pkw-Dieselmotor über die letzten Jahre einen Marktanteil in Europa von gut 50% erreicht (Weißbäck 2006).

Eine große Herausforderung vor allem für Pkw-Dieselmotoren stellt die weltweit immer restriktiver werdende Abgasgesetzgebung dar. Um auch zukünftig auf dem Markt erfolgreich zu sein, muss es bei der Entwicklung moderner Dieselmotoren gelingen, unter Beibehaltung von Vorzügen wie Fahrdynamik und Wirtschaftlichkeit, vor allem Stickstoffoxide (NO_x) und Partikelemissionen (PM) drastisch zu reduzieren. Unter diesem Gesichtspunkt ist es notwendig, eine optimale Kombination aus motorischer Verbrennung und Abgasnachbehandlung zu schaffen (Merker 2006).

Die in Abgasnachbehandlungsanlagen implementierten Katalysatoren können jedoch erst nach Erreichen einer bestimmten Mindesttemperatur, der light-off Temperatur, Schadstoffemissionen effizient umsetzen und somit dazu beitragen, die Abgasnormen zu erfüllen.

Abbildung 1 zeigt ein typisches Fahrprofil und den entsprechenden Temperaturverlauf eines Katalysators. Daraus ist ersichtlich, dass die light-off Temperatur abhängig vom Fahrprofil erst nach

einigen Minuten Fahrzeit erreicht wird (①) und selbst nach längerer Zeit wieder unter die erforderliche Mindesttemperatur sinken kann (②). In diesen Zeitspannen werden verhältnismäßig große Mengen an Stickoxiden und unverbrannten Kohlenwasserstoffen ausgestoßen (Maus et al. 2010: 340-346; Brück et al. 2010: 417 ff.).

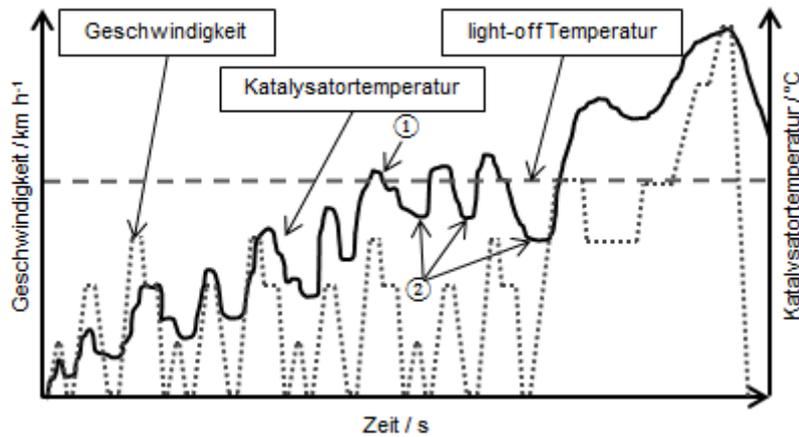


Abbildung 1: Darstellung eines typischen Katalysatortemperatur-Verlaufs während des Neuen Europäischen Fahrzyklus (NEFZ). ①: Erreichen der light-off Temperatur; ②: Absinken der Temperatur unter light-off

Abhängig von der Bauart und dem verwendeten Material des Katalysators ist dieser für die Oxidation von Kohlenmonoxid zu Kohlendioxid, von unverbrannten Kohlenwasserstoffen zu Kohlendioxid und Wasser oder für die Reduzierung von Stickoxiden zu Stickstoff und Sauerstoff zuständig. Im Allgemeinen besteht ein Katalysator aus einem Trägermaterial, metallisch oder keramisch, einer katalytisch aktiven Beschichtung, einem Gehäuse und verschiedenen Regeleinrichtungen.

2. Zielsetzung

Ziel dieser Forschungsaktivitäten sind die Optimierung des Anspringverhaltens von Katalysatoren und das Beibehalten der light-off Temperatur während des Betriebs mittels numerischer Simulation. Das entwickelte Berechnungsmodell bietet die Möglichkeit, unterschiedliche Trägermaterialien und Geometrien auf ihr Temperaturverhalten während stationärer als auch stark instationärer Betriebsbedingungen zu untersuchen. Dadurch werden sowohl ein direkter Vergleich der Katalysatorvarianten als auch eine Beurteilung von weiteren Maßnahmen zur Emissionsreduktion möglich.

3. Methodik

3.1. Modellierung

Die Simulation der Wärmetransportvorgänge in einem Katalysator erfolgt durch zwei parallel ablaufende 1D-Simulationen. Einerseits wird der Temperaturverlauf im Katalysator betrachtet, andererseits die Temperaturänderung des Abgases. Der Katalysator wird zur Berechnung in eine Vielzahl von Zellen aufgeteilt, wie in Abbildung 2 dargestellt.

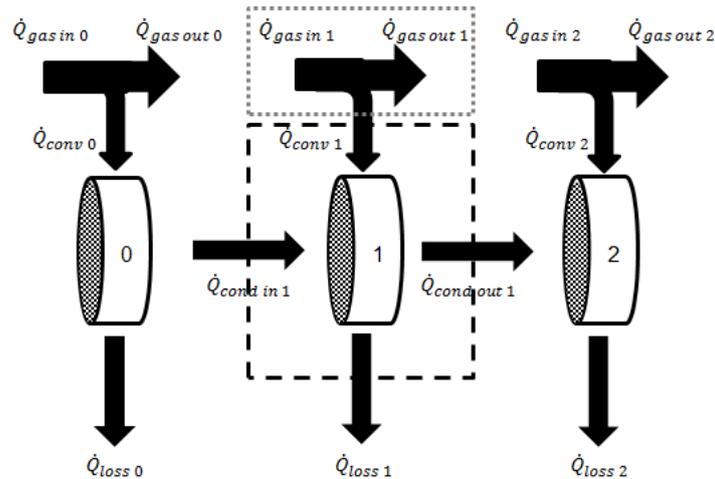


Abbildung 2: Schematische Darstellung der Wärmetransportvorgänge in den einzelnen Katalysatorzellen; Zelle 0: Katalysatoreingang; Zelle 2: Katalysatoraustritt

Die Wärmebilanz über eine Katalysatorzelle kann mit der Konduktion im Katalysator selbst $\dot{Q}_{cond\ in}$ und $\dot{Q}_{cond\ out}$, der Konvektion vom heißen Abgas an den Katalysator \dot{Q}_{conv} und den konvektiven Wärmeverlusten an die Umgebung \dot{Q}_{loss} , formuliert werden, Gl. (1).

$$\frac{dQ}{dt} = m_{cell} * c_{p\ cell} * \frac{dT}{dt} = \pm \dot{Q}_{cond\ in\ 1} + \dot{Q}_{conv\ 1} \pm \dot{Q}_{cond\ out\ 1} - \dot{Q}_{loss\ 1} \quad (1)$$

Der konduktive Wärmetransport ist ein Produkt der Wärmeleitfähigkeit der Zelle λ_{cell} pro Zelldicke s_{cell} , der Querschnittsfläche A_{front} und der Temperaturdifferenz zwischen der vorherigen und der aktuellen Zelle ($T_{cell\ 0} - T_{cell\ 1}$), Gl. (2).

$$\dot{Q}_{cond\ in\ 1} = \frac{\lambda_{cell}}{s_{cell}} * A_{front} * (T_{cell\ 0} - T_{cell\ 1}) \quad (2)$$

Die erzwungene Konvektion vom heißen Abgas an die Katalysatorzelle wird in Gl. (3) beschrieben. Diese setzt sich zusammen aus der Wärmeübergangszahl α_{gas} , der Zellfläche A_{cell} und der Differenz aus der in die Zelle einströmenden Abgastemperatur und der Zelltemperatur ($T_{gas\ in} - T_{cell}$).

$$\dot{Q}_{conv\ 1} = \alpha_{gas} * A_{cell} * (T_{gas\ in} - T_{cell}) \quad (3)$$

Die Wärmeübergangszahl ist das Produkt von der Nusselt Zahl Nu und der Wärmeleitfähigkeit des Gases λ_{gas} , dividiert durch den hydraulischen Durchmesser d_H , Gl. (4).

$$\alpha_{gas} = \frac{Nu * \lambda_{gas}}{d_H} \quad (4)$$

Die Nusselt Zahl stellt das Verhältnis zwischen Wärmestrom und Wärmeleitung durch eine ruhende Fluidschicht dar und setzt sich für diesen Fall aus der Reynolds Re und Prandtl Zahl Pr , dem hydraulischen Durchmesser d_H , der Rohrlänge l und empirisch ermittelten Größen zusammen, Gl. (5).

Der Korrekturfaktor für den Einfluss von temperaturabhängigen Stoffwerten auf die Wärmeübertragung kann für Gase vernachlässigt werden (VDI-GVC 2006).

$$Nu = \left[3,66^3 + 0,7^3 + \left(1,615 * \left(Re * Pr * \frac{d_H}{l} \right)^{\frac{1}{3}} - 0,7 \right)^3 \right]^{\frac{1}{3}} \quad (5)$$

Die aus der Zelle ausgehende Wärmeleitung kann analog zu Gl. (2) beschrieben werden. Die Temperaturdifferenz wird jedoch zwischen der aktuellen und nachfolgenden Zelle ($T_{cell\ 1} - T_{cell\ 2}$) betrachtet, Gl. (6).

$$\dot{Q}_{cond\ out\ 1} = \frac{\lambda_{cell}}{s_{cell}} * A_{front} * (T_{cell\ 1} - T_{cell\ 2}) \quad (6)$$

Die in Gl. (7) beschriebenen Wärmeverluste sind das Produkt aus der Wärmedurchgangszahl k_{loss} der Mantelfläche A_{shell} und der Temperaturdifferenz aus Zell- und Umgebungstemperatur ($T_{cell\ 1} - T_{amb}$).

$$\dot{Q}_{loss} = k_{loss} * A_{shell} * (T_{cell\ 1} - T_{amb}) \quad (7)$$

Die Wärmedurchgangszahl setzt sich abhängig von der Ummantelung und Isolierung der Zelle unterschiedlich zusammen. Im Allgemeinen ist die Wärmedurchgangszahl eine Funktion der Wärmeübergangszahlen innen und außen α_i und α_a , des Innen- und Außenradius r_i und r_a und der Wärmeleitfähigkeit der Zelle λ_{cell} sowie gegebenenfalls weiteren Wärmeleitfähigkeiten von Ummantelung und Isolierung, Gl. (8).

$$k_{loss} = \frac{2 * \pi}{\frac{1}{\alpha_i * r_i} + \frac{1}{\lambda_{cell}} * \ln\left(\frac{r_a}{r_i}\right) + \frac{1}{\alpha_a * r_a}} \quad (8)$$

Aus der Energieerhaltung folgt Gl. (9) für die Temperaturänderung des Abgases. Der eintretende Wärmestrom des Abgases $\dot{Q}_{gas\ in\ 1}$ ist gleich dem ausgehenden Wärmestrom $\dot{Q}_{gas\ out\ 1}$ und dem an den Katalysator durch Konvektion übergehenden Wärmestrom $\dot{Q}_{conv\ 1}$.

$$0 = \dot{Q}_{gas\ in\ 1} - \dot{Q}_{gas\ out\ 1} - \dot{Q}_{conv\ 1} \quad (9)$$

Die ausgehende Abgastemperatur $T_{gas\ out\ 1}$ ist gleich der in die nachfolgende Zelle eingehenden Abgastemperatur und kann durch Umformulieren von Gl. (9) berechnet werden. Die ausgehende Abgastemperatur ist abhängig vom konvektiven Wärmetransport vom Abgas an den Katalysator $\dot{Q}_{conv\ 1}$, dem Abgasmassenstrom \dot{m}_{gas} , der isobaren Wärmekapazität vom Abgas $c_{p\ gas}$ und der eingehenden Abgastemperatur $T_{gas\ in\ 1}$, Gl. (10).

$$T_{gas\ out\ 1} = \frac{\dot{Q}_{conv\ 1}}{\dot{m}_{gas} * c_{p\ gas}} + T_{gas\ in\ 1} \quad (10)$$

Mithilfe des dadurch erstellten Modells ist es möglich, unter Berücksichtigung der Auswirkungen sich ständig ändernder Betriebszustände eines Verbrennungsmotors, den Thermohaushalt eines

Katalysators über die geometrische Länge abzubilden und zu bewerten. Die Lösung der einzelnen Differenzialgleichungen erfolgt numerisch nach Euler.

3.2. Experimentelle Validierung

Das erstellte Modell wurde mit experimentellen Messungen an einem Versuchsmotor auf einem Motorprüfstand validiert. Der Versuchsaufbau setzte sich aus der Verbrennungskraftmaschine, der Leistungsbremse, einer kompletten Abgasnachbehandlungsanlage und -analytik und der Prüfstandsteuerung zusammen. Als Versuchsmotor wurde ein Reihensechszylinder-Dieselmotor mit Common Rail-Einspritzsystem, doppelter Abgasturboaufladung und Ladeluftkühlung verwendet. In Tabelle 1 sind die wesentlichen Kenndaten des Motors zusammengefasst.

Tabelle 1: Technische Daten des Versuchsmotors

Hersteller / Typ	MAN D2066 LUH	
Motorbauart	6 Zylinder, 24 Ventile	
Hubraum	10.518	cm ³
Nennleistung	206	kW
Maximales Drehmoment	1.250	Nm

Zur Bewertung des erstellten Modells wurde am Versuchsmotor ein Lastsprung zwischen zwei verschiedenen Betriebspunkten durchgeführt. Die Variationsgröße der Untersuchungen stellte die Veränderung der Leistung bei den jeweiligen Drehzahlen dar.

Lastsprung 1: Drehzahl: 900 min⁻¹, Leistung von 50 kW auf 11 kW

Lastsprung 2: Drehzahl: 1200 min⁻¹, Leistung von 85 kW auf 20 kW

Die Analyse der Abgastemperatur über die Abgasnachbehandlungsanlage erfolgte über mehrere Thermoelemente im Abgasrohr sowie in den Katalysatoren selbst.

3.3. Geometrie der Katalysatoren

Zur experimentellen Validierung des Simulationsmodells wurde ein Katalysator mit keramischem Trägermaterial verwendet. Die grundlegenden Abmessungen dieses Katalysators sind in Tabelle 2 dargestellt.

Tabelle 2: Kenndaten des Katalysators zur experimentellen Validierung

Material	Cordierit	
Zelldichte	400	cpsi
Zellwandstärke	98	µm
Länge	254	mm
Durchmesser	267	mm

Für die Berechnung des Wärmehaushaltes unterschiedlicher Katalysatoren bei stationären und instationären Betriebsbedingungen wurden zwei häufig verwendete Materialien für keramische sowie metallische Katalysatorträger miteinander verglichen. In Tabelle 3 sind die wesentlichen Kenndaten dieser Katalysatoren zusammengefasst.

Tabelle 3: Kenndaten der Katalysatoren für die Simulation

Material	Cordierit	CrAl 6 (1.4767)	
Zelldichte	400	400	psi
Zellwandstärke	110	40	μm
Länge	152	152	mm
Durchmesser	144	144	mm

4. Diskussion der Ergebnisse

4.1. Experimentelle Validierung

Abbildung 3 zeigt die Validierung des Simulationsmodells exemplarisch für den Lastsprung 1: Drehzahl: 900 min^{-1} . Der gemessene und somit berechnete Temperaturverlauf wird bei einer Katalysatorlänge von 145 mm dargestellt.

Es zeigt sich eine sehr gute Übereinstimmung der numerischen Berechnung mit dem experimentell ermittelten Temperaturverlauf. Der mittels des Simulationsmodells berechnete Temperaturverlauf reagiert geringfügig schneller auf die Abgastemperaturänderung als der gemessene. Ursachen dafür können die thermische Trägheit des Thermoelements, die Einbaulage des Thermoelements sowie die eindimensionale Simulation des Wärmehaushaltes im Katalysator sein.

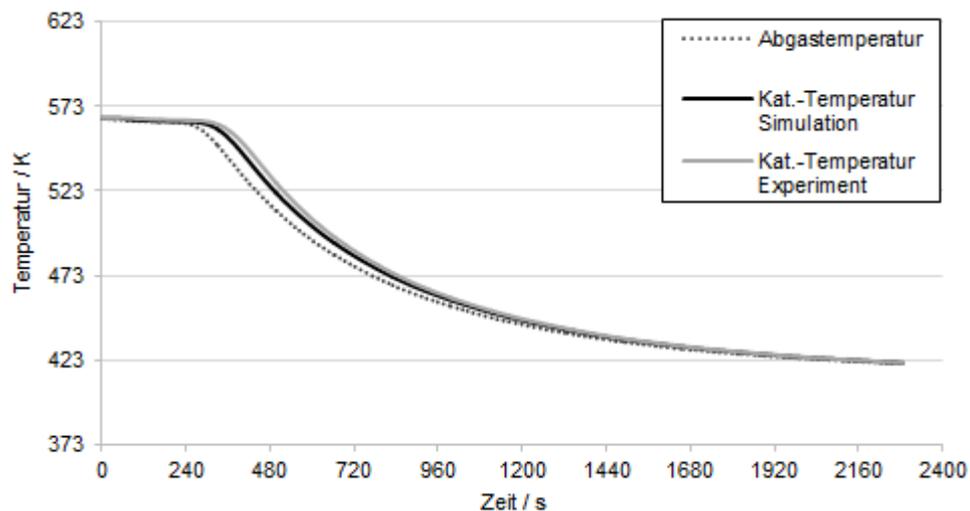


Abbildung 3: Validierung des Modells bei $n=900 \text{ min}^{-1}$ und Variation der Leistung von 50 kW auf 11 kW

4.2. Stationäres Aufheizen und Abkühlen

Abbildung 4 zeigt den simulierten Temperaturverlauf für einen stationären Aufheiz- sowie Abkühlvorgang für zwei häufig angewandte Katalysatorträgermaterialien (Cordierit und CrAl 6) mit gleichen Abmessungen. Der Temperaturverlauf wird wiederum bei einer Länge von 145 mm dargestellt. Die Temperatur während des stationären Aufheizens beträgt $300 \text{ }^\circ\text{C}$ und wird nach 240 s auf $150 \text{ }^\circ\text{C}$ zur Berechnung des Abkühlvorgangs herabgesetzt.

Die Ergebnisse zeigen, dass der metallische Träger aufgrund seiner geringeren Wärmekapazität sowie höheren Wärmeleitfähigkeit die Temperatur von 300 °C deutlich schneller erreicht als der keramische Träger. Dies bedeutet auch ein schnelleres Erreichen der light-off Temperatur nach einem Kaltstart. Aufgrund der höheren Wärmekapazität des Cordierits reagiert dieser langsamer auf Temperaturänderungen und hält somit während des Abkühlens länger eine höhere Temperatur.

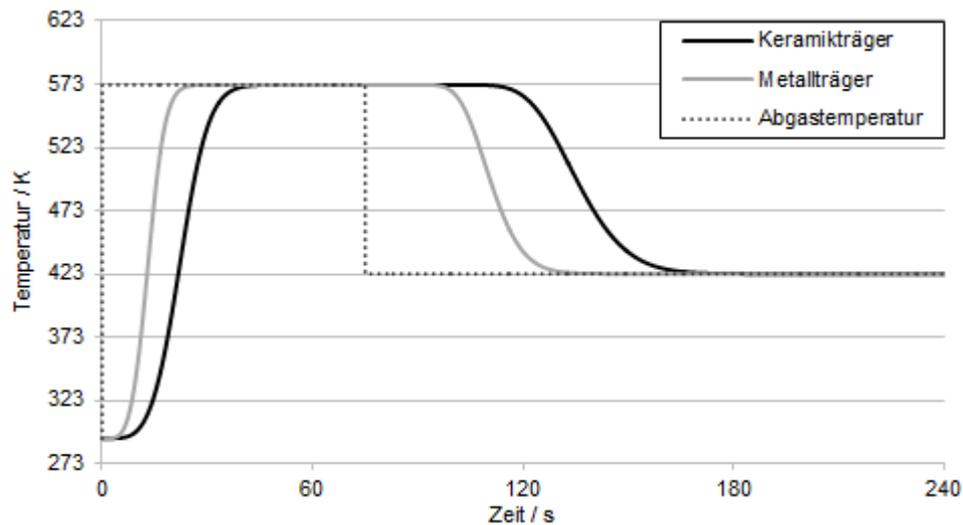


Abbildung 4: Katalysator-Temperaturverlauf während stationären Aufheizens und Abkühlens, Vergleich der Materialien Cordierit und CrAl 6 bei einer Länge von 145 mm

4.3. Instationäre Betriebsbedingungen

In Abbildung 5 ist das Temperaturverhalten von einem keramischen und einem metallischen Katalysator-Träger, mit gleichen Abmessungen bei einer Länge von 145 mm, während instationärer Betriebsbedingungen dargestellt. In dem erstellten Fahrzyklus sind Stadtfahrten inklusive Ampelstopps sowie Überlandfahrten simuliert.

Die light-off Temperatur für einen Katalysator ist von unterschiedlichen Parametern, wie Katalysatorbeschichtung oder Abgaszusammensetzung, abhängig und ist zur Veranschaulichung mit einer Temperatur von 185 °C angenommen worden.

Aus dem erstellten Zyklus ist, wie bereits während des stationären Aufheizvorgangs (Abbildung 4), zu erkennen, dass der metallische Katalysatorträger die light-off Temperatur aufgrund seiner geringeren Wärmekapazität und höheren Wärmeleitfähigkeit schneller erreicht ①. Nach diesem Zeitpunkt ist jedoch die höhere Wärmekapazität der Keramik von Vorteil, da diese dadurch träge auf Temperaturänderungen reagiert und somit ein Absinken unter die light-off Temperatur während längerer Fahrzeit seltener auftritt ②.

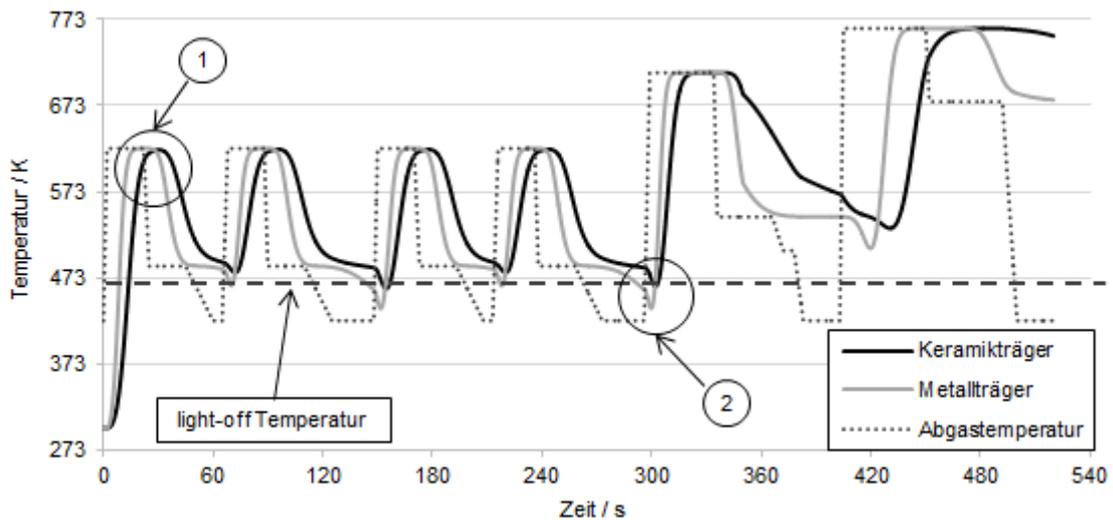


Abbildung 5: Katalysator-Temperaturverlauf während instationärer Betriebsbedingungen, Vergleich der Materialien Cordierit und CrAl 6 bei einer Länge von 145 mm

5. Zusammenfassung und Ausblick

Mithilfe des erstellten und validierten Modells ist es möglich, Auswirkungen der stark instationären Betriebsbedingungen eines Verbrennungsmotors auf den Thermohaushalt des Katalysators abzubilden. Durch die räumliche Auflösung kann ein Temperaturprofil über die geometrische Länge des Katalysators erstellt und bewertet werden. Die modellbasierten Untersuchungen zeigen, dass die Materialauswahl bedingt durch Materialeigenschaften einen entscheidenden Einfluss auf den Thermohaushalt hat.

In weiterer Folge können anhand des beschriebenen Modells zusätzliche Einflussgrößen bestimmt werden, die für das Erreichen bzw. Absinken unter die light-off Temperatur verantwortlich sind, um prädiktive Aussagen zur Optimierung des Katalysatordesigns zu treffen. Diese modellbasierten Untersuchungen umfassen geometrische Variationen, zusätzlichen Wärmeeintrag durch externe Beheizung und ferner die Betrachtung tieftemperaturaktiver Katalysatorbeschichtungen.

Literaturliste/ Quellenverzeichnis:

Weißbäck, M. (2006): Erfüllung zukünftiger Emissionsanforderungen für Diesel SUV`s. In: 15. Aachener Kolloquium Fahrzeug- und Motorentechnik, Tagungsband Nr. 1506.

Merker, G. (2006): Verbrennungsmotoren. Wiesbaden: B. G. Teubner, ISBN-10 3-8351-0080-7.

Maus, W., et al. (2010): Der E-Kat als Thermomanagementlösung in modernen Fahrzeuganwendungen. In: MTZ 71, Nr. 5, 340-346.

Brück, R., et al. (2010): Thermomanagement für Niedrigstmissionskonzepte moderner Antriebe – Der elektrisch heizbare Katalysator. In: 19. Aachener Kolloquium Fahrzeug- und Motorentechnik, Band 1, 417 ff.

Verein Deutscher Ingenieure VDI-GVC (2006): VDI-Wärmeatlas. Berlin, Heidelberg: Springer Verlag, 10. Auflage.